

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет  
Кафедра хімії високомолекулярних сполук

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана  
з навчальної роботи



*Наталія Усенко* Наталія УСЕНКО

« 30 » 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
КОМП'ЮТЕРНА ХІМІЯ ТА КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ

для здобувачів вищої освіти

галузі знань **10 Природничі науки**  
спеціальність **102 Хімія**  
освітній рівень **бакалавр**  
освітня програма **Хімія**  
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	<b>денна</b>
Навчальний рік	<b>2022/2023</b>
Семестр	<b>7</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>4.0</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>українська</b>
Форма заключного контролю	<b>залік</b>

Викладач: професор, Колендо О.Ю.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

КИЇВ – 2022

Розробники: Колендо Олексій Юрійович, проф., д.х.н., проф.,

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри хімії високомолекулярних  
сполук

 Ірина САВЧЕНКО

Протокол № 17 від 1 червня 2022 р.

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету  
Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« 30 » червня 2022 року

**1. Мета дисципліни** - вивчення основних принципів роботи з програмами хімічної графіки, обліку речовини, хімічного моделювання, квантово-хімічних розрахунків, програм візуалізації та графічної обробки спектрів, пошукових систем хімічних баз даних.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:** теоретична підготовка, що надається здобувачу освіти загальними курсами «Органічна хімія, «Неорганічна хімія» та загальним курсом «Фізика».

**3. Анотація навчальної дисципліни.** В даній дисципліні розглянуто основні комп'ютерні програми необхідні для хіміка, починаючи від загальних і закінчуючі спеціальними професійними. Розглянуто комп'ютерні програми необхідні для моделювання експерименту, спектральних даних, програм візуалізації, графічної обробки спектрів, пошукових систем хімічних баз даних, тощо. Наведено приклади користування цими програмами в кожному конкретному випадку.

**4. Завдання:** навчити студентів виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення. Навчити студентів використовувати набуті знання та вміння для обробки експериментальних даних, аналізу проведених розрахунків, інтерпретації даних і відображення та моделювання хімічних систем та процесів. Навчити студентів використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем хімії.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

<b>Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація; 4 - автономність та відповідальність)</b>	<b>Форми викладання і навчання</b>	<b>Методи оцінювання</b>	<b>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</b>
1. Основи прогнозування властивостей сполук та можливості використовувати набуті знання при проведенні наукових досліджень. Чіткі уявлення про основні комп'ютерні програми, які використовуються в хімії та межі їх застосування.	лекції, самостійні	Захист практичних робіт, перевірка завдань самостійної роботи.	10
2. Використання комп'ютеру для роботи з програмами хімічної графіки, обліку речовини, хімічного моделювання, квантово-хімічних розрахунків, програм візуалізації та графічної обробки спектрів, пошукових систем хімічних баз даних	практичні, самостійні	Захист практичних робіт, перевірка завдань самостійної роботи.	50
3.1. Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації результатів розрахунку	лекції, практичні, самостійні	Захист практичних робіт, перевірка завдань самостійної роботи.	20

3.2. Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	Захист практичних робіт, перевірка завдань самостійної роботи.	10
4. Уміти самостійно фіксувати, та інтерпретувати результати експерименту	практичні, самостійні	Захист практичних робіт, перевірка завдань самостійної роботи.	10

## 6. Схема формування оцінки

### 6.1. Форми оцінювання здобувачів освіти:

#### - семестрове оцінювання

1.1. колоквіум;

1.2. активність під час практичного заняття та оформлення результатів літературного пошуку;

1.3. виконання домашньої самостійної роботи;

1.4. написання модульної контрольної роботи.

#### - підсумкове оцінювання

залік.

### 6.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

Контроль здійснюється за модульно-рейтинговою системою.

У змістовий модуль 1 (ЗМ1) входять теми 1 - 6, у змістовий модуль 2 (ЗМ2) – теми - 7-16. Обов'язковим для заліку є набрати не менше як 48 балів за 2 змістовні модулі.

Оцінювання за формами контролю:

#### I змістовий модуль.

Максимальна кількість балів – 40.

Написання контрольної роботи – 30 балів, виконання завдань по самостійній роботі – 3 бали, інші форми контролю – 7 балів.

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовний модуль:

$30$  (контр. робота) +  $3$  (самост. робота) +  $7$  (інші форми контролю) =  $40$  балів

#### II змістовий модуль.

Максимальна кількість балів – 40.

Написання контрольної роботи – 30 балів, виконання завдань по самостійній роботі – 4 бали, інші форми контролю – 6 балів.

Розрахунок максимальної кількості балів за змістовний модуль:

$30$  (контр. робота) +  $4$  (самост. робота) +  $6$  (інші форми контролю) =  $40$  балів

**Підсумковий** контроль знань студента проводиться у формі письмового заліку, під час якого може бути отримана максимальна кількість балів – 20.

**Підсумкова семестрова рейтингова** оцінка складається з семестрової модульної та залікової оцінок і дорівнює 100 балам.

	Змістовий модуль 1 (ЗМ1)	Змістовий модуль 2 (ЗМ2)	Залік	Разом (підсумкова оцінка)
Оцінка (бали)	40	40	20	100

### 6.3. Шкала відповідності (за умови заліку)

За 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою
60-100	Зараховано
1-59	Не зараховано

## СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### Тематичний план лекцій, практичних занять та самостійних робіт

№	Назва лекції	Кількість годин		
		лекції	практичні роботи	самост. робота
Змістовий модуль I				
1	Програма "Windows" та основні принципи роботи в її середовищі. Програми пакету "Microsoft Office": "Word" та "Excel". Основні принципи	4		8
2	Програми хімічної графіки "Chemwin", "Chemsketch".	2		6
3	Програми хімічної графіки "Chemdraw" та "ISISdraw". Основні принципи роботи з ними.	2	2	6
4	Програма хімічного моделювання "ACD Lab".	2		6
5	Програма обліку речовин "Chembase". Пряме введення, імпорт та експорт даних.	2	2	4
6	Програма візуалізації та графічної обробки спектрів "Mestrenova", "ADVASP".	2		4
Змістовий модуль II				
7	Робота з графічною програмою "Origin". Обробка графічного зображення.	2	2	4
8	Програма хімічного моделювання "Hyperchem".	2		4
9	Оптимізація геометрії методами молекулярної механіки. Вимірювання відстаней, плоских та двограних кутів між атомами.	2		4
10	Моделювання в "Hyperchem", знаходження оптимального конформера	2	2	10
11	Три типи зображення: стержневі, куле-стержневі та кульові моделі молекул. Оптимізація геометрії напівемпіричними методами.	2		8

12	Програма квантово-хімічних розрахунків "МОРАС".	2	2	6
13	Проведення оптимізації геометрії молекули. Розрахунок активаційних бар'єрів хімічних процесів.	2		6
14	Фур'є трансформація спектру. Фазування спектру. Вибір меж візуалізації.	2		4
	<b>Усього</b>	<b>30</b>	<b>10</b>	<b>80</b>

**Загальний обсяг 120 год., у тому числі:**

**Лекцій – 30 год.**

**Практичних занять – 10 год.**

**Самостійних робіт - 80 год.**

### **Рекомендована література**

1. Колендо О.Ю. Комп'ютерне моделювання органічних сполук і полімерів. Київ, ВПЦ «Київський університет», 2017, 80 с.
2. Young D. MORAC Computational Chemistry / D. Young. - Wiley-Interscience. - 2001. Appendix A. A.3.2 - P. 342.
3. J.J.P. Stewart // Journal of the American Chemical Society. – 1985. – V.107 (13). – P. 3902.
4. Stewart J. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method / J.J.P. Stewart // J. Comput. Chem. – 1989. – V.10 (2). – P. 209.
5. HyperChem for Windows/ New-York, Pergamon Press, 1992, 297 p.

### **Інтернет ресурси**

1. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_modelling](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_modelling) та список посилань у статті.
2. [https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular\\_mechanics](https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_mechanics) та список посилань у статті.
3. <https://www.acdlabs.com/> - "ACD Lab".
4. <https://en.wikipedia.org/wiki/ISIS/Draw>
5. <https://www.originlab.com/>